天体环境下原子核中子俘获截面经验公式的理论研究*

张子航[1)] 李鸿博[2)] 仕敏[3)] 方基宇[4†)]

1)（安徽大学纽约石溪学院，合肥 230039）

2)（安徽大学物理与光电工程学院，合肥 230601）

3)（安徽建筑大学数理学院，合肥 230601）

4)（安徽理工大学力学与光电物理学院，淮南 232001）

摘 要

原子核的中子俘获反应对理解宇宙重元素起源具有重要作用. 然而，现有理论模型在中子俘获截面的预测上仍存在较大误差或较为复杂，限制了对宇宙重元素起源的深入理解. 本文在已有中子俘获截面经验公式的基础上，提出了一种仅含 3 个可调参数的新经验公式. 将 AME2020 原子核中子分离能数据作为输入，结果表明，新公式在 Te-Hg 核区可以在约 2 倍的范围内符合 KADoNiS 中子俘获截面数据. 与已有经验公式相比，新公式在中子俘获截面的预测精度和普适性方面均取得显著提升. 本文的研究成果为高精度预测中子俘获截面提供一种便捷方法，从而对深入研究宇宙重元素起源具有重要意义.

关键词：核反应；中子俘获截面；经验公式；元素起源

PACS：24.10.-i, 26.30.Hj

1 引 言

原子核反应在恒星演化、元素起源和核能应用中都起着至关重要的作用. 在天体物理学领域，核反应对解释恒星内部环境及化学元素的起源尤为关键. 自上世纪以来，元素核合成理论取得显著进展，研究恒星的内部结构和演化以及元素核合成过程，一直是科学家们探索的核心课题. 恒星不仅是宇宙中的基本天体，它们的演化和化学过程直接影响着整个宇宙的元素丰度与结构. 随着天文学和核物理学的不断发展，科学家们逐渐揭示了恒星内部的核反应机制，构建了从轻元

***基金项目**：安徽省高校协同创新项目（批准号：GXXT-2023-007）、安徽省高校优秀青年科研项目（批准号：2022AH030039）

[†]**通信作者**：方基宇，E-mail: jiyufang@aust.edu.cn

素到超重元素的核合成理论框架. 许多杰出的科学家为这一领域的发展做出了开创性的贡献[1].

20 世纪初，Eddington 通过研究恒星的能量生成机制，提出了恒星内核核反应的理论，首次揭示了恒星能够发光并维持高温的物理原理. 这为后来的恒星演化研究奠定了基础. 然而，恒星内的核反应并非单纯的热量生成过程，它们同时也是化学元素合成的源泉[2]. 1938 和 1939 年，核物理学家 Weizsäcker 和 Bethe 分别提出了太阳内部存在热核聚变反应的观点. Bethe 的研究对恒星核反应机制的理解做出了重要贡献，尤其是在氢氦融合反应方面，阐明了恒星如何通过核融合释放能量并延续其生命. Bethe 的工作不仅帮助我们理解了恒星的生命周期，也为天文物理学的研究提供了理论基础[3, 4].

进入 20 世纪 40 年代，Gamow、Alpher 和 Herman 提出了大爆炸核合成理论，该理论解释了宇宙初期如何通过核反应合成轻元素如氢、氦等，为现代宇宙学研究提供了理论基础，并通过后续观测验证了轻元素的丰度预测[5]. 1956 年，Suess 和 Urey 综合陨石和太阳光谱资料，编制了新的元素丰度表[6]. 此外，Fowler 还与 Margaret Burbidge、Geoffrey Burbidge 和 Hoyle 提出了著名的 B^2FH 理论[7]，详细阐述了恒星如何通过核合成生成重元素，并揭示了这些元素与恒星演化的密切关系. Fowler 因其对核反应的研究以及对宇宙化学元素分布的解释获得了 1983 年诺贝尔物理学奖. 这一贡献不仅加深了人类对恒星演化的理解，也为研究超新星爆发和中子星合并等极端天体物理环境中的重元素合成机制提供了理论支持. 同一时期，Cameron 利用当时流行的计算机技术进行独立研究，得出了相同的理论[8].

随着对恒星内核反应的理解逐渐深入，Merrill 发现了星际空间中的稀有元素锆（Zr）和钨（W），为研究早期宇宙中这些重元素的核合成提供了观测证据，尤其是在研究恒星中化学元素的分布时，Merrill 的工作为后来的天体化学和核合成理论提供了关键的数据支持，同时，Merrill 还在恒星金属丰度研究领域作出了重要贡献. 他是最早使用光谱学研究恒星金属丰度的天文学家之一. 通过对恒星光谱的分析，他揭示了不同类型恒星中重元素（如铁、钙、镁等）的相对丰度，推动了天体物理学中有关恒星演化和元素合成的研究[9-11]. 此外，Chamberlain 和 Aller 通过恒星光谱分析，进一步揭示了恒星的金属丰度和元素合成的规律，为天体化学的研究做出了奠基性贡献[12].

1952 年，物理学家 Hauser 和 Feshbach 提出了著名的 Hauser-Feshbach 理论，该理论中的核反应是通过多体统计方法来近似的. 其基本思想是，给定初始状态的入射粒子，反应过程可看作是多个可能的途径之一，直到系统达到一个平衡状态，其在核物理中尤其适用于描述那些无法直接通过量子力学解出个别轨道波函数的反应，尤其是在高能核反应中[13]. 到了 70 年代，Woosley 和 Howard 提出了关于快中子俘获过程（r-过程）的模型，揭示了在超新星爆炸的物理过程，以及如何通过中子俘获合成重元素，如金、银和铀[14-16].

以上科学家的研究成果为我们理解宇宙中的元素形成、恒星演化以及核反应过程提供了宝贵的理论和实验依据. 这些探索不仅深化了我们对宇宙的认识，也推动了天体物理学、宇宙学和核物理学的交叉发展. 这些研究表明，恒星内部能够通过核反应生成了除氢和氦以外的其他元素. 如今，物理学已经能够提供一个整体框架来解释元素的起源. 虽然取得了显著进展，但如今对于铁以上重元素的生成机制仍存在诸多未解之谜. 由于铁以上元素的聚变反应是吸热的，无法阻止

恒星坍缩，其生成主要通过中子俘获过程. 中子俘获过程分为慢中子俘获过程（s-过程）和 r-过程. r-过程在核天体物理领域非常重要，但是受实验技术与天文观测的限制，目前对 r-过程合成机制的研究还不完善，使得中子俘获截面的预测存在很大挑战性.

1986 年，Woosley 基于原子核中子俘获反应的微观理论，提出了一个中子俘获截面的半经验公式[16]，然而，该公式与实验数据相差较大. 近年来，Couture、Casten 和 Cakirli 等人，将原子核划分至不同核区，提出预测中子俘获截面的高精度经验公式[17, 18]，但是该公式在不同核区采用不同参数，普适性较差. 本文在已有研究的基础上，对 Woosley 的公式进行了改进，基于最新的 KADoNiS 中子俘获截面数据，提出了一个新的可预测原子核中子俘获截面的高精度公式，且具有一定的普适性，有助于人们更好地理解 r-过程以及宇宙中重核元素的起源.

2 理论公式

1986 年，Woosley 提出了在最可几能量 kT = 30 keV 下重原子核中子俘获平均热截面的半经验公式[16]：

$$\overline{\sigma}_{n\gamma}(30\ \text{keV}) = 0.75\ \text{mb}\left(F(J_I)/A_c^{3.6}\right)\exp\left[0.455A_c^{0.6}\sqrt{Q_{n\gamma}-\delta}+13.2/(A_c^{0.6}\sqrt{Q_{n\gamma}-\delta})\right] \quad (1.1)$$

式中 $\sigma_{n\gamma}$(30 keV)为 30 keV 下原子核中子俘获截面，J_I 是靶核的基态自旋，$F(J_I)$ 为自旋因子. 其中 $F(J_I)$与 q 的表达式为：

$$F(J_I) = \left[3(2J_I+1)+11/(2J_I+1)\right]\exp\left[-J_I(J_I+1)/2q^2\right] \quad (1.2)$$

$$q = 0.1223A^{5/6}a^{-1/4}(Q_{n\gamma}-\delta)^{1/4} \quad (1.3)$$

以上各式中的 A 为靶核质量数，A_c 为复合核的质量数(A_c=A+1)，$Q_{n\gamma}$ 为复合核中子分离能，a~A/9 为原子核能级密度参量，δ 为能级密度公式中的后移能量参量，其表达式为

$$\delta = \alpha - \frac{80}{\mathrm{A}}, \quad \alpha = \begin{cases} 0 & \text{奇-奇} \\ 11/A^{1/2} & \text{奇-偶} \\ 22/A^{1/2} & \text{偶-偶} \end{cases} \tag{1.4}$$

2021 年，Couture 等人结合中子俘获截面和双中子分离能的最新数据，通过系统分析，提出了预测中子俘获截面的经验公式[18]：

$$\sigma_{\text{fit}} = a_1 \exp\left(a_2 S_{2n} + a_3\right) \tag{1.5}$$

其中 S_{2n} 为双中子分离能，a_1=0.0106 mb，a_2=0.764 MeV^{-1}，a_3=a_2*p_2，对于参数 p_2，文献[18]中将 p_2 的具体数值从 Fe-Hg 分为不同核区分别给出.

受到公式(1.1)的启发，为了得到更为简便，形式更加统一的高精度预测公式，基于最新的 KADoNiS 中子俘获截面数据[19,20]和 AME2020 中子分离能数据[21, 22]，进行重新拟合. 去掉自旋因子项 $F(J_I)$和指数上的 A_c 项，稍作调整，得出如下新经验公式：

$$\sigma = A_c^{c_1}\ \text{mb}\ \exp\left(c_2\sqrt{Q_{n\gamma} - \delta} + c_3 / \sqrt{Q_{n\gamma} - \delta}\right) \tag{1.6}$$

采用 AME2020 中的 $Q_{n\gamma}$ 数据，通过拟合 KADoNiS 中子俘获截面数据，可得 c_1=1.70，c_2=1.43 MeV$^{-1/2}$，c_3=14.06 MeV$^{1/2}$. 相较于公式(1.1)和(1.5)，新提出的经验公式(1.6)形式更加简洁，且不划分核区，具有更好地普适性.

同时，对于公式(1.5)，我们基于最新中子俘获截面的实验值和双中子分离能，不再通过参数 p_2 区分不同核区，与公式(1.6)一样直接使用三个系数，拟合全部核区，最终得到了公式(1.5)在不分区情况下的新公式：

$$\sigma = d_1 \exp\left[d_2\left(S_{2n} + d_3\right)\right] \tag{1.7}$$

其中 d_1=3.85 mb，d_2=0.23 MeV^{-1}，d_3=5.96 MeV. 在实际计算中，公式(1.1)、(1.5)、(1.6)和(1.7)中关于 $Q_{\mathrm{n}\gamma}$ 或 $S_{2\mathrm{n}}$ 的单位都取 MeV.

为了评价各公式模型的预测能力，采用中子俘获截面理论值和实验值自然对

数的均方根偏差来比较

$$\mathrm{RMSE}(\ln\sigma)=\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\ln\sigma_i^{\mathrm{th}}-\ln\sigma_i^{\exp}\right)^2 \Big/ N} \tag{1.8}$$

公式中 $\sigma^{\exp}$ 的值取自文献[19,20]，但只考虑 Te-Hg 核区的原子核，N 代表评估均方根偏差涉及的原子核数目.

3 结果讨论

为了对比公式(1.1)、(1.5)、(1.6)的拟合精度，图 1 分别给出了公式(1.1)、(1.5)、(1.6)预言的中子俘获截面与实验值的自然对数之差. 总体来看，公式(1.5)和公式(1.6)对中子俘获截面的描述明显优于公式(1.1). 其中，公式(1.5)的预言值与实验值的差距较小，自然对数之差都在 1 以内，公式(1.1)预言的 Eu、Gd、Dy、Yb、Hf、W、Hg 等核的中子俘获截面与实验值偏差较大，自然对数值之差甚至超过 4，公式(1.6)则是对 Hg 以及部分 Te 附近的原子核描述较差. 同时，对比发现，在去掉自旋因子 $F(J_I)$后，公式(1.6)相比公式(1.1)，变得更加简洁，但却能更好地再现实验值. 而公式(1.5)在只用双中子分离能不考虑原子自旋的情况下，通过不同核区采用不同的参数，也取得了较好的预测结果. 综上，推测得出，靶核自旋对于这些核区中子俘获截面的影响不大，对中子俘获截面影响最大的主要是中子分离能与复合核质量.

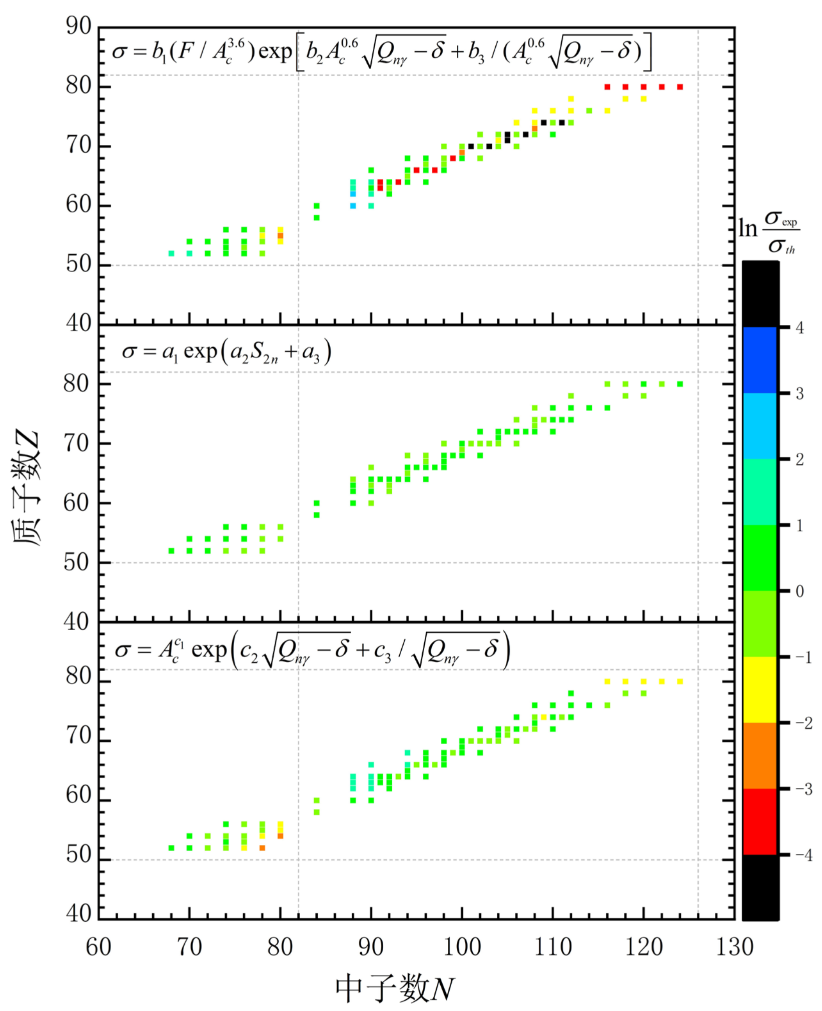


图 1　中子俘获截面实验值与公式(1.1)、(1.5)、(1.6)计算的理论值的自然对数的差值. 虚线为传统幻数.

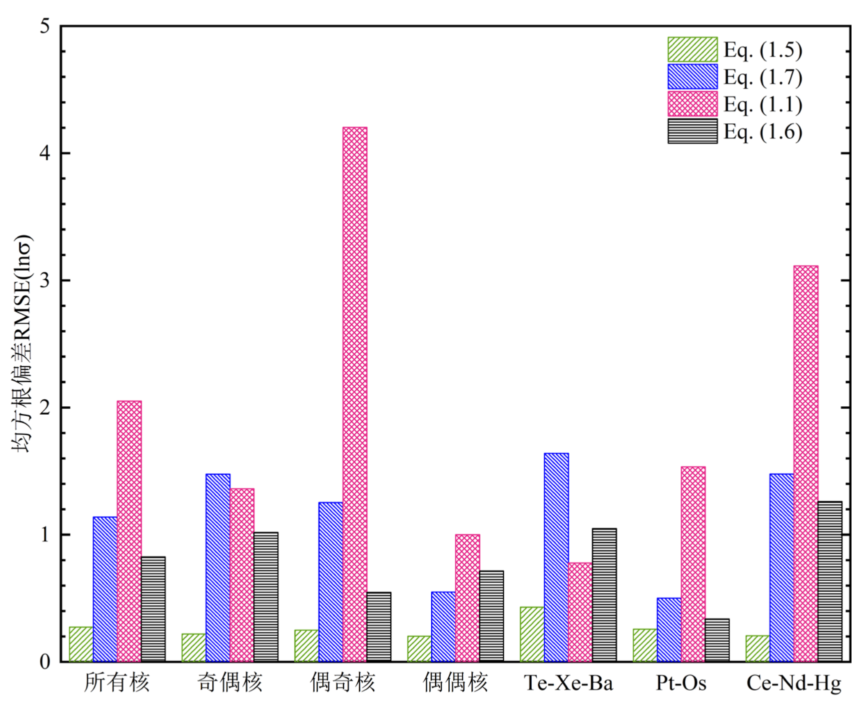


图 2　中子俘获截面理论值与实验值自然对数的均方根偏差.

为了进一步研究各经验公式对实验中子俘获截面的描述能力，图 2 给出了公式(1.1)、(1.5)、(1.6)、(1.7)中子俘获截面理论值和实验值自然对数的均方根偏差，包括本文研究的全部核、奇偶核、偶奇核、偶偶核、Te-Xe-Ba 核区、Pt-Os 核区以及 Ce-Nd-Hg 核区. 从图可见，公式(1.5)的均方根偏差在各个核区均是最小，预测精度最高. 公式(1.1)均方根偏差最大，预测能力较差，特别是在偶奇核与 Ce-Nd-Hg 核的预测上效果很不理想. 而公式(1.6)的预测精度虽然低于公式(1.5)，但是对于偶偶核以外的原子核，其精度均优于公式(1.7)，尤其是对于偶奇核，均方根偏差小一倍左右. 对于奇偶核，公式(1.1)、公式(1.7)和公式(1.6)的均方根偏差相近，预测能力相差不大. 定量上，对于本文考虑的所有原子核，公式(1.1)、(1.5)、(1.6)、(1.7)预言的中子俘获截面自然对数的均方根偏差分别为 2.052、0.274、0.826、1.139，即这些公式可以在 7.783、1.315、2.284、3.124 倍的范围内符合中子俘获截面的实验数据.

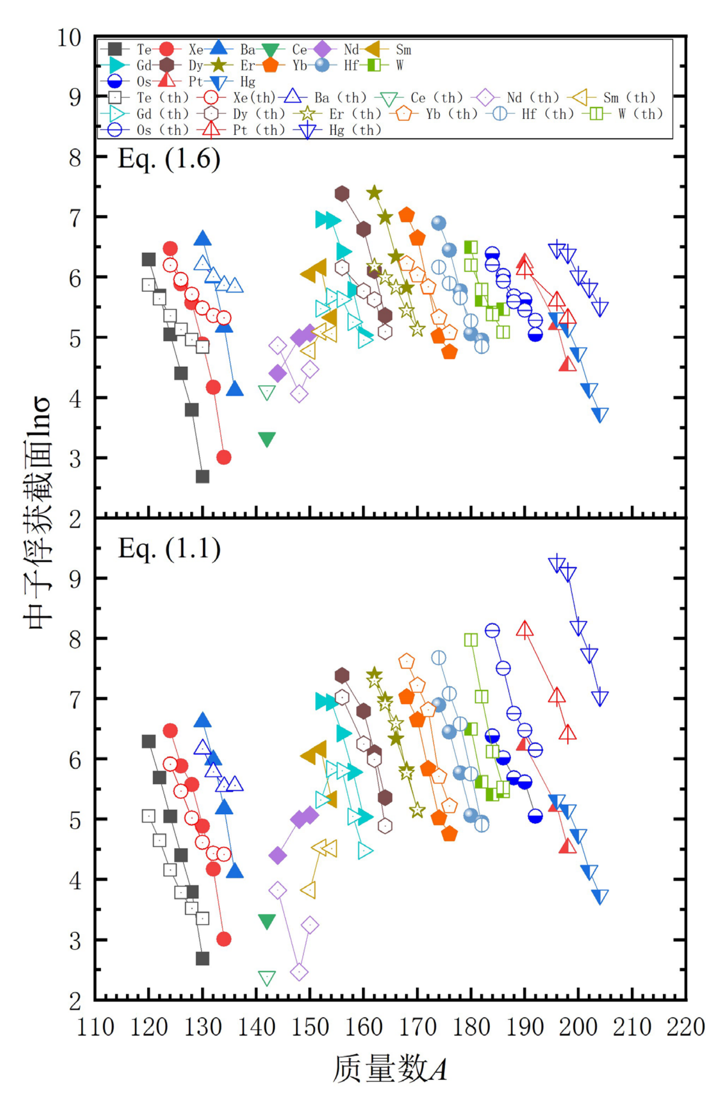


图 3　64 个偶偶核中子俘获截面理论值和实验值的自然对数随原子核质量数的变化关系. 实心和半实心图标代表实验值，空心图标代表理论值. 纵轴为中子俘获截面的自然对数，横轴为原子核的质量数.

从图 2 中可以看出，各个经验公式均能更好地描述偶偶核的中子俘获截面，并且，公式(1.1)对于 Te-Xe-Ba 核区、Pt-Os 核区以及 Ce-Nd-Hg 核区的描述精度呈现变低的趋势. 因此，对于偶偶核，进一步研究了公式(1.1)和最新提出的公式(1.6)的预言结果与质量数 A 的关系，如图 3 所示. 作为对比，图中还给出了相应的实验数据. 整体上，公式(1.6)的预测结果优于公式(1.1)，对于大部分原子核，公式(1.6)的理论预测值更接近实验值，效果更好. 特别地，对于一些质量数较大的原子核，如 Hg、Pt、Os、W 同位素链，公式(1.6)的预测能力显著优于公式(1.1). 对于 Dy 和 Er 同位素链，两种经验公式的预测能力比较接近，而对于质量数处

于 120~140 的原子核，公式(1.1)的预言结果优于公式(1.6). 为了研究能级密度公式中的后移能量参量 δ 对中子俘获截面的影响，将公式(1.6)去掉参量 δ，得到如下公式

$$\sigma = A_c^{c_1} \exp\left(c_2 \sqrt{Q_{n\gamma}} + c_3 / \sqrt{Q_{n\gamma}}\right) \tag{1.9}$$

通过重新拟合中子俘获截面实验值确定其参数 c_1、c_2、c_3. 对比公式(1.6)和(1.9)中子俘获截面预测值与实验值自然对数的均方根偏差，发现引入参量 δ 的公式(1.6)比公式(1.9)的均方根偏差降低约 9%，这说明参量 δ 的引入有助于提升经验公式对中子俘获截面的预测能力.

4 总 结

本文在已有中子俘获截面经验公式的基础上，提出了一种更加简洁且适用于较大核区的高精度经验公式. 将 AME2020 原子核中子分离能数据作为输入，通过拟合 KADoNiS 中子俘获截面数据确定经验公式参数. 新经验公式尽管只有 3 个可调参数，但是在 Te-Hg 核区仍然可以约 2 倍的范围内符合 KADoNiS 中子俘获截面数据，在中子俘获截面的预测精度和普适性方面均取得显著提升，显著简化了已有经验公式在参数繁多或计算过程复杂的问题. 本文的研究成果为高精度预测中子俘获截面提供一种便捷方法，可以为各种高精度质量模型提供 r-过程研究所需的中子俘获截面预测，有助于加深人们对宇宙中重元素起源的理解.

参考文献：

[1]WALLERSTEIN G, IBEN I, PARKER P, et al. Synthesis of the elements in stars: forty years of progress [J]. Reviews of Modern Physics, 1997, 69(4): 995.

[2]EDDINGTON A S. THE INTERNAL CONSTITUTION OF THE STARS [J].

Science (New York, NY), 1920, 52(1341): 233-40.

[3]BETHE H A. Energy production in stars [J]. Physical Review, 1939, 55(5): 434.

[4]BETHE H A, CRITCHFIELD C L. The formation of deuterons by proton combination [J]. Physical Review, 1938, 54(4): 248.

[5]ALPHER R A, BETHE H, GAMOW G. The origin of chemical elements [J]. Physical Review, 1948, 73(7): 803.

[6]SUESS H E, UREY H C. Abundances of the elements [J]. Reviews of Modern Physics, 1956, 28(1): 53.

[7]BURBIDGE E M, BURBIDGE G R, FOWLER W A, et al. Synthesis of the elements in stars [J]. Reviews of modern physics, 1957, 29(4): 547.

[8]CAMERON A G. Nuclear astrophysics [J]. Annual review of nuclear science, 1958, 8(1).

[9]MERRILL P W. Stellar spectra of class S [J]. Astrophysical Journal, 56, 457-482 (1922), 1922, 56.

[10]MERRILL P W. Spectroscopic observations of stars of class S [J]. Astrophysical Journal, vol 116, p 21, 1952, 116: 21.

[11]MERRILL P W. Technetium in the N-type star 19 Piscium [J]. Publications of the Astronomical Society of the Pacific, Vol 68, No 400, p 70, 1956, 68: 70.

[12]CHAMBERLAIN J W, ALLER L H. The Atmospheres of A-Type Subdwarfs and 95 Leonis [J]. Astrophysical Journal, vol 114, p 52, 1951, 114: 52.

[13]HAUSER W, FESHBACH H. The inelastic scattering of neutrons [J]. Physical review, 1952, 87(2): 366.

[14] WOOSLEY S, HOWARD W. The p-process in supernovae [J]. Astrophysical Journal Supplement Series, vol 36, Feb 1978, p 285-304, 1978, 36: 285-304.

[15] WOOSLEY S, FOWLER W A, HOLMES J, et al. Semiempirical thermonuclear reaction-rate data for intermediate-mass nuclei [J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1978, 22(5): 371-441.

[16] WOOSLEY S. Nucleosynthesis and stellar evolution; proceedings of the Saas-Fee Advanced Course 16: Nucleosynthesis and Chemical Evolution, F, 1986 [C].

[17] COUTURE A, CASTEN R F, CAKIRLI R. Simple, empirical approach to predict neutron capture cross sections from nuclear masses [J]. Physical Review C, 2017, 96(6): 061601.

[18] COUTURE A, CASTEN R, CAKIRLI R. Significantly improved estimates of neutron capture cross sections relevant to the r process [J]. Physical Review C, 2021, 104(5): 054608.

[19] Z. Y. BAO, H. BEER, F. KÄPPELER, F. VOSS, K. WISSHAK and T. RAUSCHER. Neutron cross sections for nucleosynthesis studies [J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2000, **76**(1): 70.

[20] I. Dillmann, M. Heil, F. Kappeler, R. Plag, T. Rauscher, and F.-K. Thielemann. KADoNiS - The Karlsruhe Astrophysical Database of Nucleosynthesis in Stars, AIP Conf. Proc. 2006, 819, 123; online at http://www.kadonis.org.

[21] HUANG W, WANG M, KONDEV F G, et al. The AME 2020 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data, and adjustment procedures [J]. Chinese

Physics C, 2021, 45(3): 030002.

[22] WANG M, HUANG W J, KONDEV F G, et al. The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references [J]. Chinese Physics C, 2021, 45(3): 030003.

Theoretical Study on the Empirical Formula for Neutron Capture Cross-Section in Atomic Nuclei under Astrophysical Environment

ZHANG Zi-hang[1)] LI Hong-bo[2)] SHI Min[3)] FANG Ji-yu[4†)]

1)(Stony Brook Institute at Anhui University, Anhui University, Hefei 230039, China)

2)(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Anhui University, Hefei 230601, China)

3)(School of Mathematics and Physics, Anhui Jianzhu University, Hefei 230601, China)

4)(School of Mechanics and Photoelectric Physics, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China)

Abstract

The neutron-capture reaction in atomic nuclei plays a key role in understanding the origin of heavy elements in the universe. However, existing theoretical models still have large errors or complexity in predicting neutron-capture cross sections, which limits the deep understanding of the origin of heavy elements. Based on existing empirical formulas for neutron-capture cross sections, this paper proposes a new empirical formula with only three adjustable parameters. Using the neutron separation energy data from AME2020 as input, the results show that the new formula can reproduce the KADoNiS neutron-capture cross section data within a factor of about two in the Te-Hg nuclear region. Compared with existing empirical formulas, the new formula achieves significant improvements in both prediction accuracy and universality of neutron-capture cross sections. The results of this work provide a convenient method for high-precision predictions of neutron-capture cross sections, which is important for deep studies on the origin of heavy elements in the universe.

Key words: Nuclear Reactions; Neutron-Capture Cross Section; Empirical Formula; Element Origin